

Title	Variable Range Hopping伝導領域での磁気抵抗：状態内クーロン相関の効果(計算機による固体相転移の研究,科研費研究会報告)
Author(s)	黒部, 篤; 上村, 洸
Citation	物性研究 (1982), 37(6): 56-62
Issue Date	1982-03-20
URL	<a href="http://hdl.handle.net/2433/90504">http://hdl.handle.net/2433/90504</a>
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

# Variable Range Hopping 伝導領域での磁気抵抗

—— 状態内 クロン 相関の効果 ——

東大・理 黒部 篤・上村 光

Variable range hopping 伝導領域での磁気抵抗は、状態内 クロン 相関 の効果による。正になる。さらに、Anderson 局在状態 での局在長のエネルギー依存性を考慮すれば、磁気抵抗へ負 の寄与がある。IT-Ta<sub>2-x</sub>Se<sub>2x</sub>系での磁気抵抗の実験結果は、 両者の効果として定性的に理解できる。

## §1. 序論

山口・青木・上村<sup>1)</sup>は、中間濃度領域で、様々な電子相 関の大きさを評価し、Anderson 局在状態間の電子相関のうちで、状態内 相関が最も大きい事を示し、次のハミルトニアンを提唱した。

$$\mathcal{H} = \sum_{i\sigma} E_i \hat{n}_{i\sigma} + \frac{1}{2} \sum_i U_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \quad \text{----- (1)}$$

ここで、 $i$  は Anderson 局在状態を意味し、 $E_i$ ,  $U_i$ ,  $\hat{n}_{i\sigma}$  は各々 一電子エネルギー、状態内相関、number operator を表わしている。  $E_i$  はランダムな量であって、 $U_i$  は一般に  $E_i$  に依存する。状態内相関 は、電子比熱の enhancement, 低温での Curie 帯磁率といった物 性に反映している。又一方、状態間相関が低温での比熱の 異常に重要な役割を演じている事は、本研究会で、竹森・上村

により報告されている。ここでは (i) のハミルトニアンを採用し、状態内相関の *variable range hopping* 伝導への効果をパーコレーション理論<sup>2)</sup> により計算する。ただし、 $U_i$  の  $E_i$  依存性は簡単のため無視し、 $U_i = U$  とおく。特に、磁気抵抗への効果を議論し、 $\text{IT-TaS}_{2-x}\text{Se}_x$  の実験結果と比較する。

## §2. ホッピング過程

状態内相関のある場合の Anderson 局在状態は、(i) 空の状態 (UO 状態)、(ii) 一電子占有状態 (SO 状態)、(iii) 二電子占有状態 (DO 状態) の 3 つのタイプがある。SO 状態に、逆向きスピンをもつ電子をもち込んで、DO 状態をつくると、もち込んだ電子は状態内相関により  $E_i + U$  のエネルギー準位を占める。この時に注意すべき事は、もち込んだ電子は SO 状態よりもゆるく束縛され、空間的に広く局在している事である。これを表わすために SO 及び DO 状態の局在長を各々  $\xi_1, \xi_2$  ( $\xi_2 > \xi_1$ ) と書く。 $\xi_1, \xi_2$  は一般にエネルギー  $E_i$  に依存するが、しばらくの間、簡単のために、エネルギーには依存せず一定であると仮定する。

上述の 3 つの局在状態に対して、次の 4 つのホッピング過程が存在する。

- (1) SO から UO 状態への過程
- (2) SO から SO 状態への過程

(3) DO から UO 状態への過程

(4) DO から SO 状態への過程

ただし、ここで spin flip 過程は無視する。従って (2) の過程で

は、始状態に於て、2つの SO 状態のスピンは互いに反平行

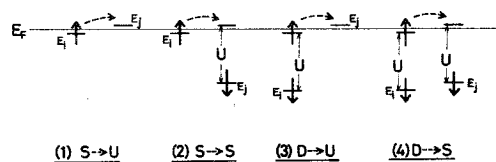


図 1

である事が要求されている。この事情を図示したのが図1である。これら4過程は、各々、図1に示したエネルギー近傍で最も起こりやすく、どの過程もホッピング伝導に寄与する。(ここでは、状態内相関  $U$  は  $E_i$  の分布中より小さい場合を考えている。)

パーコレーション理論を使って、電気抵抗の温度依存性を、低温極限で計算すると、3次元では次のようになる。

$$\rho \propto \exp(T_0/T)^{1/4} \quad \text{----- (2)}$$

$$T_0 = 13.2 \times \frac{1}{\nu k_B} \frac{\xi_1^3 + 3\xi_2^3}{(\xi_1^3 + \xi_2^3)^2 + 4\xi_2^6} \quad \text{----- (3)}$$

ここに  $\nu$  は状態密度である。(2)式は、状態内相関の無い時の variable range hopping 伝導で良く知られている Mott の  $1/4$  乗則<sup>3)</sup>が、今の場合も成立する事を示しているが、(3)式に見られるように、 $T_0$  は  $\xi_1, \xi_2$  の両方の局在長に依存するように、拡張されている。計算においては、intrinsic hopping rate は Miller and Abrahams<sup>4)</sup> の表式を仮定した。又、hopping rate

を決める局在長は、(1)の過程では  $\xi_1$ , (2)~(4)では  $\xi_2$  としている。

### §3. 石磁気抵抗

次に、石磁場中で、4つのホッピング過程にどのような変化が起こるか調べる。石磁場を印加すると SO 状態の free spins は石磁場と平行になろうとする。その結果、SO  $\rightarrow$  SO 過程は起こらなくなる。何故なら、ホッピング後に出来る DO 状態が spin singlet にならないからである。ところで、SO  $\rightarrow$  SO 過程と DO  $\rightarrow$  UO 過程とは互いに逆過程になっているために、詳細つり合いの原理から同じ遷移確率でホップする。つまり、石磁場による SO  $\rightarrow$  SO 過程の抑制は、DO  $\rightarrow$  UO 過程の抑制をも意味する。従って石磁気抵抗  $\frac{\Delta\rho(H)}{\rho(0)}$  は、これら2過程の抑制により正になる。様々な温度での石磁気抵抗の数値計算例

を示したのが図2である。計算は(2)式を導出した時と同じパーコレーション理論を使い、3次元で行なっている。石磁気抵抗は、正の符号で、石磁場  $H$  の増加に比例

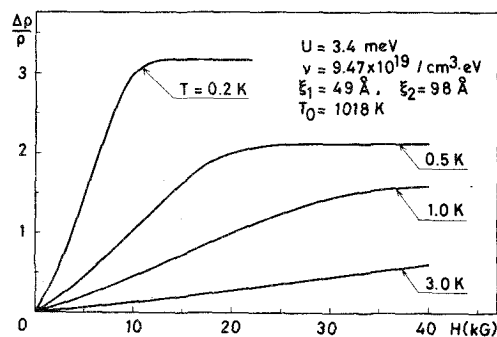


図 2

して増加し、ある石磁場  $H_{\text{sat}}$  以上で飽和する。飽和値は、

$$\left. \frac{\Delta \rho(H)}{\rho(0)} \right|_{\text{sat}} = \exp \left[ 13.2 \left( \frac{1}{\nu k_B T} \right)^{\frac{1}{4}} \left\{ \left( \frac{\xi_1^3 + \xi_2^3}{\xi_1^6 + \xi_2^6} \right)^{\frac{1}{4}} - \left( \frac{\xi_1^3 + 3\xi_2^3}{(\xi_1^3 + \xi_2^3)^2 + 4\xi_2^6} \right)^{\frac{1}{4}} \right\} \right] - 1. \quad \text{----- (4)}$$

で与えられる。温度の減少に伴って、飽和値は増加し、

$H_{\text{sat}}$  は減少する。

#### §4 IT-TaS<sub>2-x</sub>Se<sub>x</sub>系との比較

IT-TaS<sub>2-x</sub>Se<sub>x</sub>系は、低温で variable range hopping 伝導を示す。この温度領域の高温側での石磁気抵抗は石磁場の増加に伴って、正で立ち上がり、最大値を通過した後減少する。一方低温側では、負の石磁気抵抗だけが観測されている。<sup>5), 6)</sup> 福山・芳田<sup>7)</sup>はこの負の石磁気抵抗を説明するために、Anderson 局在状態の広がり  $\xi_i$  がエネルギー  $E_i$  に依存する事を考慮した。我々は別の立場に立ち、これと同じ機構を取り入れた計算を行なった。

図1にみるように、SO → UO 過程は、 $E_i = E_F$  近傍で起こる。石磁場中では、上向きスピンの電子に対する一電子状態のエネルギー準位は、 $E_i - \mu_B H$  となるから、ホッピングは

$E_i - \mu_B H = E_F$  近傍で起こる。よって移動度端  $E_c$  と  $E_i$  との差、 $E_c - E_i$  が石磁場とともに減少する事になり、局在の広がりを増す。この事は、ホッピングの遷移確率を増加

させるから、石磁気抵抗へは負の寄与がある。実際の数値計算例を図3に示す。

この計算は2次元系で行ない、 $\xi_i(E_i) \propto (E_c - E_i)^{-1}$ を仮定している。石磁気抵抗が磁場の増加に従って、正から負へと移行する様子は、 $1\text{T-TaS}_{2-x}\text{Se}_x$

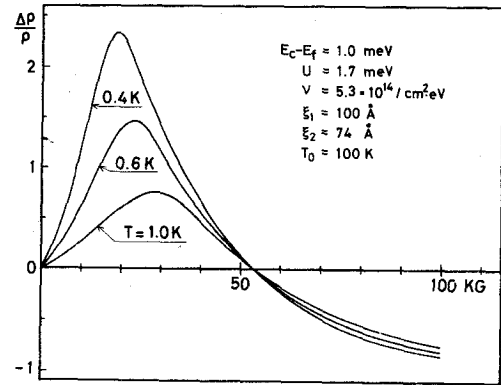


図 3

の実験を再現している。さらに、正の部分の寄与について調べてみると、(3)式と(4)式を比べて  $T_0$ が増加すると( $\xi_1, \xi_2$ が減少)、 $\frac{\Delta P}{P}|_{\text{sat}}$ も増加するから、 $T_0$ の大きい方が正の石磁気抵抗も大きい事が結論できる。(この定性的な議論は2次元でも3次元でも変わらない。) 実験においても、 $1\text{T-TaS}_2$ にSe dopingをして、 $T_0$ を増加させると、石磁気抵抗の正の部分が増加する事が観測されている。<sup>5)</sup>

状態内相関だけを考慮した今の計算では、 $T \rightarrow 0$ に従って、 $\Delta P/P|_{\text{sat}} \rightarrow \infty$ となるが、実験的には、 $T \lesssim 0.5\text{K}$ で負の石磁気抵抗のみになる。これは、今の formalism で落とした、状態間のクーロン相互作用の効果であると考えられる。充分低温では、direct exchange や kinetic exchange といった状態間相互作用により、SO状態のスピン同士

が強く相互作用し合う。<sup>8)</sup> その結果、石炭場を加えても、SO状態のスピンが石炭場の方向に整列しなくなり、石炭抵抗へ正の寄与をしたものの機構が働かなくなる。従って、負の寄与だけが残ると考えられる。

#### References

- 1) E.Yamaguchi, H.Aoki, H.Kamimura, J. Phys. c 12, 4801(1979): See also a review by H.Kamimura, Phil. Mag. B 42 763 (1980).
- 2) M.Pollak, J. Non-Cryst. Sol. 11, 1 (1972).
- 3) N.F.Mott and E.A.Davis, "Electronic Processes in Non-Crystalline Materials" Clarendon Press, Oxford 2nd ed. (1979).
- 4) A.Miller and E.Abrahams, Phys. Rev. 120, 745 (1960).
- 5) Y.Onuki, R.Inada and S.Tanuma, Physica 99 B, 177 (1980).
- 6) N.Koayashi and Y.Muto, Solid State Commun. 30, 337 (1979).
- 7) H.Fukuyama and K. Yoshida, J. Phys. Soc. Japan 46, 102 (1979).
- 8) 竹森,上村; 本研究会報告集